



TARTU RIIKLIK ÜLIKOOL

J. Lembra

BOHRI TEOORIA

TARTU 1977

TARTU RIIKLIK ÜLIKOOL

Teoreetilise füüsika kateeder

J. Lembra

BOHRI TEOORIA

TARTU 1977

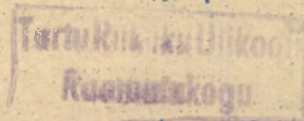
Kinnitatud füüsika-keemiateaduskonna
nõukogus 17. detsembril 1976

E e s s õ n a

Käesoleva õppevahendi kasutajana on mõeldud eelkõige täppisteaduste vastu huvi tundvaid keskkooliõpilasi, kes on koondunud TRÜ Matemaatika-Füüsikakooli juurde. Seetõttu põhineb õppematerjali esitus peamiselt keskkooli füüsikakursusel. Kuid erinevalt üldkasutatavast keskkooliõpikust on siin tehtud mõningaid lihtsaid teisendusi, millega tutvumine pakub õppureile võimalusi iseseisvaks tööks ülesannete lahendamise näol. Õppevahendit võivad teatud määral kasutada ka kõrgkoolide üliõpilased, kelle erialaks ei ole füüsika.

Arh.

KUSTUTATUD



4217 4467

1. Lihtsamaid seaduspärasusi aatomispektrites.

Möödunud sajandi teisel poolel tehti kindlaks, et kiirgavatel aatomitel on joonspekter, kiirgavatel molekulidel - ribaspekter. Pandi ka tähele, et aatomispektrites ei paikne jooned korrapäratult, vaid rühmituvad nn. seeriateks. Näiteks vesiniku aatomispektri nähtavas ja lähedases ultraviolettpiirkonnas eksisteerib seeria, mille lainepikkuste arutamiseks andis 1885. a. Balmer järgmise lihtsa valemi

$$\lambda = \frac{\lambda_0 n^2}{n^2 - 4}, \quad (1)$$

kus λ_0 on konstant, n - kahest suurem täisarv ($n = 3, 4, 5, \dots$). Täpsustuseks olgu öeldud, et Balmer püstitas valemi (1) teiste uurijate katsetulemuste üldistamise alusel. Vesiniku aatomispektri seeriat, mille lainepikkused rahuldavad valemit (1), hakati nimetama Balmeri seeriaks.

Balmeri valemile (1) võib anda lihtsama kuju, kui lainepikkuse asemel sisse tuua lainearv, mis on defineeritud kui lainepikkuse pöördväärtus vaakumis. Tähistades lainearvu sümboliga $\bar{\nu}$, võime kirjutada

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda}. \quad (2)$$

Valemist (2) järgneb, et lainearv näitab, kuipalju lainepikkusi vaakumis mahub pikkusühikule.

SI-süsteemis on lainearvu mõõtühikuks pöördmeeter (m^{-1}). Kuid spektroskoopias on seni levinud lainearvu mõõtühikuna pöördsentimeeter (cm^{-1}), mida nimetatakse ka kaiseriks (lühendatult K^x), s.o. $1 \text{ K} = 1 \text{ cm}^{-1}$.

^{x)}Seda lühendit ei tohi segada hiljuti temperatuuri mõõtühikuna kasutusele võetud Kelvini lühendiga.

Meenutame, et lainepikkus λ on sagedusega ν seotud valemiga

$$\lambda \nu = c, \quad (3)$$

kus c on valguse kiirus vaakumis.

Kasutades seoseid (2) ja (3), leiame

$$\nu = \overline{\nu} c, \quad (4)$$

s.o. sagedus ja lainearv on teineteisega võrdelises sõltuvuses.

Kasutades valemit (2), võib valemi (1) ümber kirjutada kujul

$$\overline{\nu} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (5)$$

kus $R = \frac{4}{\lambda_0}$. Konstanti R nimetatakse Rydbergi konstandiks. Selle konstandi väärtus on nüüdisaegsetel andmetel:

$$R = 10967757,6 \pm 1,2 \text{ m}^{-1}.$$

Võrdlus eksperimendiga näitas, et valem (5) (ja muidugi ka valem (1)) kuulub nende füüsikaseaduste hulka, mis täituvad eriti suure täpsusega. Rõhutame eriti fakti, siin hõkavad esmakordselt füüsika ajaloos täisarvud mängima erilist osa füüsikaseaduste formuleerimisel.

Hiljem näitas Rydberg, et teisteski aatomispektrites on täisarvudel otsustav tähtsus lainearvu määramisel. Rydberg avastas, et meelevaldses aatomispektris võib spektrijoone lainearvu esitada kahe täisarvuliste argumentidega funktsiooni vahena. Selliseid funktsioone nimetatakse spektraaltermideks. Niisiis Rydbergi järgi

$$\overline{\nu} = T_1 - T_2, \quad (6)$$

kus T_1 ja T_2 on spektraaltermid. Seejuures osutus, et antud seeria juhul on T_1 konstantne, T_2 aga muutub.

Nagu näitab valemite (5) ja (6) võrdlus, on vesiniku aatomispektri termidel üldkuju

$$T = \frac{R}{k^2}, \quad (7)$$

kus k on täisarv. Balmeri seeriat iseloomustav konstantne term realiseerub juhul $k = 2$, muutuv term juhul $k = n$ ($= 3, 4, 5, \dots$).

Illustratsioonina olgu veel lisatud, et leelismetallide aatomispektrid meenutavad välise kuju poolest vesiniku aatomispektrit. Seetõttu, arvestades tulemust (7), võib nende spektraalterme esitada kujul

$$T = \frac{R}{(k+x)^2}, \quad (8)$$

kus x on väike parandusliige.

2. Bohri teooria põhiseisukohad.

Spektraaltermide füüsikaline sisu selgus alles käesoleva sajandi teisel kümnendil. Seda tegi 1913.a. taani füüsik Niels Bohr (1885 - 1962). Selle avastuse ajaloo detailidega tutvumiseks võib soovitada populaarteaduslikku artiklit /1/.

N. Bohr kasutas ära Plancki tulemuse, mille järgi valguse ei kiirgu pidevalt, vaid kindla suurusega jagamatute annuste (kvantide) kaupa. Neid kvante võib käsitleda kui valguse osakesi - footoneid. Footoni energia ϵ sõltub seejuures tema sagedusest ν järgmise valemi järgi:

$$\epsilon = h\nu, \quad (9)$$

kus konsonanti $h = 6,6252 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$ nimetatakse Plancki konsonandiks.

Olgu aatomi energia enne ja pärast footoni kiirgamist vastavalt $w^{(i)}$ ja $w^{(f)}$. Energia jäävuse seadusest järgneb nüüd, et $\epsilon = w^{(i)} - w^{(f)}$. Edasi saame valemist (9)

$$\nu = \frac{w^{(i)} - w^{(f)}}{h}. \quad (10)$$

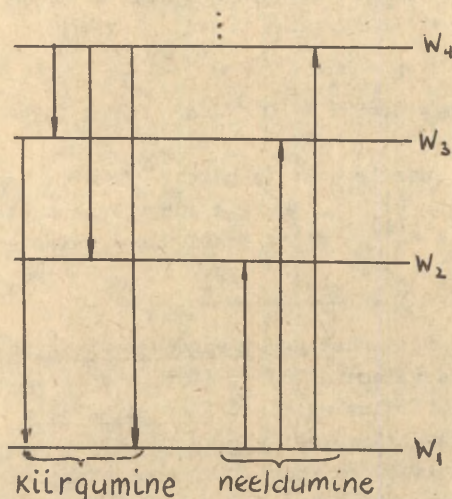
Tulemus (10) väljendab Bohri sageduste reeglit.

Võrdleme nüüd valemid (6) ja (10). Seejuures arvestame veel valemist (4). Võrdlus näitab, et spektraalterm on kuni konstantse liidetava täpsuseni võrdeline aatomi energiaga. Kui meenutada eelmisest punktist, et termide argumendid on täisarvulised, siis võivad nad omandada vaid teatud diskreetseid väärtusi. Järelikult Bohri järgi võib aatom eksisteerida ainult seisundis, milles tema energia omandab teatud diskreetseid väärtusi. Selliseid seisundeid nimetatakse stationaarseteks seisunditeks.

Väikseima energiaga statsionaarsed seisundid nimetatakse põhiseisundiks, kõiki ülejäänuid statsionaarseid seisundeid ergastatud seisunditeks.

Statsionaarses seisundis aatom ei kiirga. Kiirgus toimub vaid aatomi siirdumisel ühest statsionaarsest seisundist teise. Seejuures Bohri sageduste reegel võimaldab aatomi energia teadmisel statsionaarsetes seisundites leida kiirguse sageduse, s.o. arvutada spektri.

Statsionaarseid seisundeid kujutatakse graafiliselt energiatasemete skeemi abil. Energiatasemed joonistatakse välja horisontaalsete sirglõikudena. Energiatasemed paiknevad seda kõrgemal, mida suurem on seisundi energia, kusjuures tasemetevaheline kaugus on võrdeline seisundite energiatega vahetega (vt. joon. 1). Põhiseisundile vastavat taset nimetatakse põhitasemeks, kõiki ülejäänud tasemeid - ergastatud tasemeteks. Näiteks joonisel W_1 on põhitase, W_2, W_3, W_4, \dots - ergastatud tasemed.



Joonis 1.

Siirdeid statsionaarsete seisundite vahel kujutatakse energiatasemete skeemil vertikaalsete nooltega, mis algavad algseisundit kirjeldavalt tasemelt ja lõpevad lõppseisundit kirjeldaval tasemel.

Normaalselt on aatom väikseima energiaga seisundis, s.o. põhiseisundis. Teiste sõnadega: normaalselt aatom "paikneb" põhitasemel. Asudes põhitasemel aatom loomulikult ei saa kiirata. Kui mingisuguse välise mõjustuse (näiteks põrkumine elektroniga) tulemusena aatom viiakse ergastatud tasemele, siis siirdudes tagasi põhitasemele või madalamale ergastatud tasemele, kiirgab ta footoni, mille sagedus on antud valemiga (10). Selliseid footoni kiirgamisega seotud siirdeid kujutatakse joonisel ülalt alla suunatud vertikaalnooltega.

Footoni neelamine leiab aset siis, kui aatom siirdub põhitasemelt ergastatud tasemele või antud ergastatud tasemelt teisele kõrgemale ergastatud tasemele. Kuna normaalselt asub aatom põhiseisundis, siis praktiliselt realiseerub ainult esimesena mainitud võimalus. Sellest järgneb, et aatom võib neelata ainult sellise sagedusega kiirgust, mis langeb kokku kiirguse sagedusega, mis tekib aatomi siirdumisel ergastatud tasemetelt põhitasemele. Sellega saabki teoreetilise põhjenduse hästi tuntud fakt, et neeldumisspektris on vähem jooni kui kiirgusspektris.

Aatomi statsionaarsete seisundite olemasolu tõestati eksperimentaalselt 1914. a. saksa füüsikute G. Hertzi ja J. Francki poolt.

Edasi tekib teooria arendamisel loomulikult küsimus: kuidas leida mehhaaniliselt võimalikest liikumistest üles need liikumised, mis vastavad statsionaarsetele seisunditele.

Mainitud küsimustele andis N. Bohr ka vastuse, üldistades Plancki tulemusi absoluutselt musta keha kiirguse uurimisel. Sellele küsimusele vastuse leidmise detailide käsitlemine ei mahu kahjuks füüsika elementaarkursuse raamidesse. Toome siin ära ainult lõpptulemuse Sommerfeldi poolt üldistatud kujul: olgu meil tegemist süsteemiga, millel on q vabadusastet. Siis statsionaarsetele seisunditele vastavad need liikumised, mille juhul täituvad tingimused:

$$\oint p_j dx_j = n_j h$$

$$(j = 1, 2, \dots, q). \quad (11)$$

Valemis (11) on x_j j -ndale vabadusastmele vastav üldistatud koordinaat. (Üldistatud koordinaatideks nimetatakse parameetrite kompleksi, millega süsteemi asend liikumisel on täielikult määratud. Näite anname järgmises punktis.) p_j on üldistatud koordinaadile x_j vastav üldistatud impulss, mis on defineeritud järgmiselt:

$$p_j = \frac{\partial W_{kin}}{\partial \dot{x}_j}, \quad (12)$$

kus W_{kin} on süsteemi kineetiline energia ja $\dot{x}_j = \frac{dx_j}{dt}$, milles t on aeg. Valemis (12) on tegemist nn. osatuletisega: funktsioonist W_{kin} tuleb võtta tuletis argumendi \dot{x}_j järgi, vaadeldes ülejäänud argumente muutumatutena.

Ringike integraalimärgi juures näitab, et integreerida tuleb tsükliliselt üle kogu üldistatud koordinaadi x_j määramispiirkonna.

n_j on valemis (11) täisarvud, mida nimetatakse kvantarvudeks.

Tingimusi (11) nimetatakse Bohr-Sommerfeldi kvantiseerimistingimusteks.

Kuigi me ei käsitlenud käesolevas õppevahendis kvantiseerimistingimuste detailset püstitamist, rõhutame, et nendel ei olegi ranget tuletust. Asi on selles, et kvantiseerimistingimused on Bohri teooria raamides füüsika põhiseaduste osas. Kuid füüsika põhiseadused ei ole matemaatiliselt tuletatavad. Need püstitatakse katsetulemuste üldistamise teel. Kuid sellise üldistamise käigus ei ole välistatud matemaatilise aparatuuri kasutamine. Seda antud juhul tehtigi (kuid meie seda siin ei käsitlenud). Kvantiseerimistingimuste, nagu teistegi füüsikaseaduste õigsuse kriteeriumiks on nende alusel tehtud arvutuste kooskõla eksperimentidega.

3. Vesinikuaatomi teooria Bohri järgi.

Eelmise punkti üldiste seisukohtade rakenduse näitena arendame siin lihtsaima ehitusega aatomi - vesinikuaatomi teooriat Bohri järgi. Me teeme seda mõnevõrra üldisemal kujul, arvestades peale vesinikuaatomi ka ioone, mis oma ehituselt sarnanevad vesinikuaatomiga. Need on ioonid, milles ümber tuuma liigub üksainus elektron. Selliseid ioone nimetatakse tavaliselt vesinikusarnasteks aatomiteks. Selliste ionide näiteks on He^+ (ühekordselt ioniseeritud heelium), Li^{++} (kahekordselt ioniseeritud liitium) jne.

Üldjuhul, kui meil on element järjenumbriga Z , siis teatavasti selle elemendi aatomite tuuma laeng on Ze (e - elementaarlaeng, $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$) ja igal neutraalsel aatomil on Z elektroni. Niisiis, vesinikusarnase aatomi saamiseks tuleb $Z - 1$ elektroni neutraalsest aatomist eemaldada.

Lihtsustamiseks käsitleme siin ainult elektroni ringliikumist ümber tuuma. Elliptiliste orbiitide käsitlemine annab, nagu näitab vastav arvutus, millel meie ei peatu, sisuliselt samad tulemused.

Arvutuste lõppeesmärgiks on meil vesinikusarnaste aatomite spektrijoonte sageduste (või lainepikkuste ja lainearvude) tuletamine. Et rakendada Bohri sageduste reeglit (10), peame teadma, milline on aatomi energia. Kuna vesinikusarnases aatomis on üksainuke elektron, siis piisab ainult selle elektroni koguenergia W teadmisest. W avaldub kineetilise ja potentsiaalse energia summana. Kineetiline energia W_{kin} avaldub valemiga

$$W_{\text{kin}} = \frac{mv^2}{2}, \quad (13)$$

kus m on elektroni mass, v - tema kiirus.

Potentsiaalse energia W_{pot} leidmisel arvestame, et elektron, mille laeng on $-e$, on vastastikuses mõjustuses tuumaga, mille laeng on Ze . Seega Coulombi seaduse järgi saame

$$W_{\text{pot}} = - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (14)$$

kus ϵ_0 on elektriline konstant ($\epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12}$ F/m) ning r on elektroni ja tuuma vaheline kaugus.

Valemite (13) ja (14) abil leiame

$$W = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (15)$$

Seda avaldist saab kompaktsemalt ümber kirjutada, kui arvestada Newtoni II seadust. Selle järgi on elektroni massi korrutis tsentripetaalkiirendusega võrdne mõjuva jõuga, viimaseks on kuloniline jõud. Seega

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}, \quad (16)$$

millest saame:

$$mv^2 = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (17)$$

Asendades valemis (15) mv^2 valemi (17) abil, saame elektroni koguenergia avaldada nii

$$W = - \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r}. \quad (18)$$

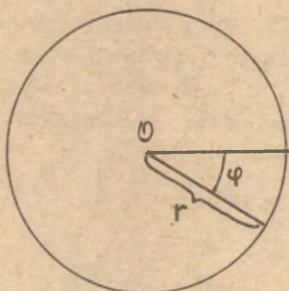
Avaldisest (18) ilmneb, et elektroni koguenergia ringliikumisel ümber tuuma võrdub potentsiaalse energiaga juhuks, kui elektroni ja tuuma vaheline kaugus oleks $2r$. Seda tulemust võib ära kasutada avaldise (18) meelepidamise hõlbustamiseks.

Avaldises (18) on e ja ϵ_0 universaalkonstandid, Z aga süsteemi iseloomustav konstant. Seega statsionaarse seisundi energia leidmiseks peab eelnevalt leidma statsionaarse ringorbiidi raadiuse r . Seda saab teha kvantiseerimistingimuste (11) rakendamisel.

A. Kvantiseerimistingimus ringorbiitide juhul.

Elektroni liikumisel piki ringorbiiti raadiusega r on tal ainult üks vabadusaste (millele eelmise punkti tähistustes vastab $q = 1$).

Elektroni asend on määratud, kui teame pöördemurka φ (vt. joonis 2, millel tuum asub punktis O). Selle nurga valimegi üldistatud koordinaadiks.



Joonis 2.

Järgmisena on vaja teada sellele üldistatud koordinaadile vastavat üldistatud impulssi p_φ . Avaldise (12) järgi

$$p_\varphi = \frac{\partial W_{\text{kin}}}{\partial \dot{\varphi}}. \quad (19)$$

Osatuletise arvutamiseks peame teadma W_{kin} sõltuvust $\dot{\varphi}$ - st. See on lihtne, kui arvestada, et $v = \omega r$, kus ω on elektroni nurkkiirus. Kuid $\omega = \dot{\varphi}$. Seega võib avaldise (13) ümber kirjutada kujul

$$W_{\text{kin}} = \frac{mr^2\dot{\varphi}^2}{2}. \quad (20)$$

Avaldisest (20) osatuletise võtmine $\dot{\varphi}$ järgi annab

$$p_\varphi = mr^2\dot{\varphi}. \quad (21)$$

Meenutades, et elektroni kiirus $v = r\dot{\varphi}$, saame valemist (21)

$$p_{\varphi} = mvr, \quad (22)$$

s.o. p_{φ} võrdub elektroni pöördeimpulsiga tuuma suhtes. See on aga elektroni ringliikumisel ümber tuuma konstantne.

Ainuke kvantiseerimistingimus, mis antud juhul eksisteerib, avaldub vastavalt valemile (11) kujul

$$\int_0^{2\pi} p_{\varphi} d\varphi = nh. \quad (23)$$

0

Siin on kasutatud asjaolu, et φ täieliku määramispiirkonna arvestamine on tagatud integreerimisega rajades 0-st kuni 2π . Arvestades, et p_{φ} on konstantne, võime selle tuua valemis (23) integraalimärgi ette. Järelejäänud integraal võrdub ilmselt 2π . Nii saame

$$p_{\varphi} = n\hbar, \quad (24)$$

kus

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}. \quad (25)$$

Valem (24) näitab, et kvantiseerimistingimuse rakendamine viib järgmise nõudeni: elektroni kõikidest mehhaaniliselt võimalikest liikumistest ümber tuuma piki ringorbiite statsionaarsetele seisunditele vastavad ainult need, milles elektroni pöördeimpuls on tuuma suhtes on võrdne täisarvu n kordne suurusel \hbar .

Füüsikalise sisu poolest võib kvantarv n antud juhul omandada väärtusi

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad (26)$$

Väärtus $n = 0$ ei ole füüsikaliselt mõeldav, sest siis peaks elektroni trajektoor läbima tuuma. Kuid siis ei ole aatom stabiilne.

x) Populaarses esituses alustatakse käsitelu avaldisest (24), nimetades seda üheks Bohri postulaadiks. Diferentsiaal- ja integraalarvutuses väheste kogemustega lugeja võib selle valemi tuletuskäigu vahele jätta.

Statsionaarse seisundi energia arvutamiseks valemi (18) alusel on meil vaja teada statsionaarse orbiidi raadiust. Seda on lihtne teha, kui kasutada Newtoni II seadust koos kvantiseerimistingimusega.

Asendame p_r avaldisest (22) avaldisse (24):

$$mvr = n\hbar. \quad (27)$$

Nüüd vaatleme koos valemeid (17) ja (27). Seda valempaari võib käsitleda kui võrrandsüsteemi meie tundmatute suuruste v ja r arvutamiseks.

Elimineerime esmalt avaldise (27) abil kiiruse

$$v = \frac{n\hbar}{mr}. \quad (28)$$

Asendades siit v valemisse (17), saamegi viimasest leida

$$r = \frac{4\pi n^2 \hbar^2 \epsilon_0}{Zme^2}. \quad (29)$$

Avaldises (29) läheme avaldise (25) abil suuruselt n üle suurusle h :

$$r = \frac{n^2 h^2 \epsilon_0}{Z\pi me^2}. \quad (30)$$

Kirjutame tulemuse (30) ümber kujul

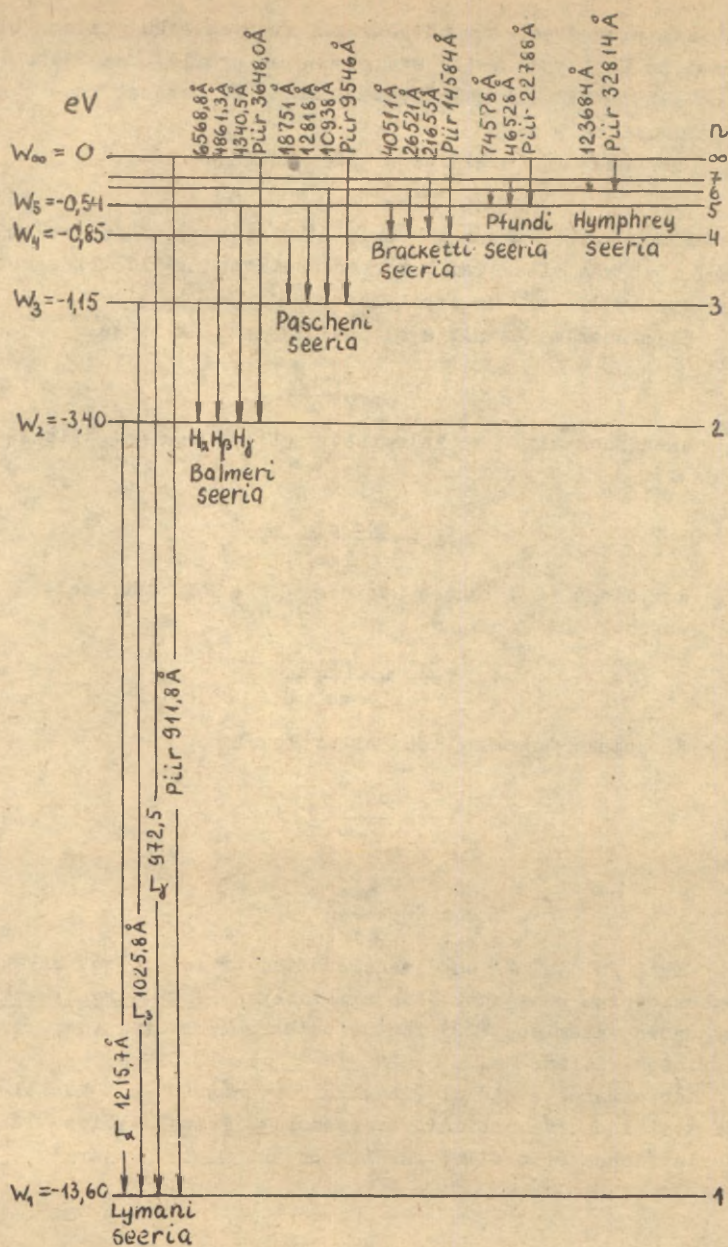
$$r = \frac{a_0 n^2}{Z}, \quad (31)$$

kus

$$a_0 = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi me^2}. \quad (32)$$

Kuna n ja Z on dimensioonitud, siis a_0 on pikkuse dimensiooniga konstant. Seda nimetatakse Bohri raadiuseks. Asendades valemisse (32) tuntud universaalkonstantide arv-väärtused, leiame $a_0 = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 0,529 \text{ \AA}$.

Arvestades avaldist (26), võib kvantarvu n käsitleda kui statsionaarse orbiidi järjenumbrit. Tuumale kõige lähema statsionaarse orbiidi raadius on valemi (31) järgi $\frac{a_0}{Z}$.



Joonis 3.

Kui siin võtta veel $Z = 1$, mis vastab vesinikuaatomile, saame a_0 . Sellega oleme selgitanud, et Bohri raadius võrdub vesinikuaatomis tuumale kõige lähema statsionaarse ringorbiidi raadiusega. Toodud a_0 arvvärtus näitab, et valemi (31) abil arvutatud statsionaarsete orbiitide raadiused on kooskõlas eksperimendist teadaoleva aatomi mõõte suurusjärguga 10^{-10} m.

Asendades statsionaarse orbiidi raadiuse r valemist (30) avaldisse (18), saamegi elektroni energia W_n statsionaarses seisundis:

$$W_n = - \frac{Z^2 m e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2 n^2} . \quad (33)$$

Avaldisest (33) näeme, et elektroni energia on tõepoolest täisarvu funktsioon^{x)}, s.t. energia võib omandada ainult teatud diskreetseid väärtusi. See on täielikus kooskõlas eelmise punkti algul toodud seisukohtadega.

Kasutades eelmises punktis sissetoodud energiatasemete mõistet, veendume valemi (33) abil, et põhitaseme jaoks on kvantarv $n = 1$, ergastatud tasemete jaoks $n > 1$. Ühtlasi on valemist (33) ilmne, et tasemed paiknevad seda kõrgemal, mida suurem on kvantarv n . Ka on ilmne, et kõrgemal asetsevad tasemed paiknevad üksteisele lähemal kui madalamal paiknevad tasemed. Öeldut on illustreeritud joonisel 3.

Huvipakkuv on elektroni kiiruse teadmine statsionaarsel ringorbiidil liikumisel. Selleks asendame raadiuse r valemist (30) valemisse (28)

$$v = \frac{Z e^2}{2 \epsilon_0 h n} , \quad (34)$$

Siin on otstarbekohane, ehkki see esialgses Bohri teooria variandis puudus, sisse tuua nn. peenstruktuurikonstant:

$$\alpha = \frac{e^2}{2 \epsilon_0 h c} . \quad (35)$$

Lihtne on veenduda, et α on dimensionsonitu konstant. Asendades avaldisse (35) universaalkonstantide arvvärtused, leiame, et $\alpha = \frac{1}{137}$. Peenstruktuurikonstant võeti füüsikas kasutuse-

^{x)} Selle rõhutamiseks ongi sümbolile W lisatud indeks n .

le spektrite peenstruktuuri uurimisel. Hiljem selgus, et see konstant on üldisema tähendusega: ta on osakeste elektromagnetilise vastastikuse mõjustuse intensiivsust iseloomustav konstant. Kuna vesinikusarnase aatomi tuuma ja elektroni elektrostaatiline vastastikune mõjustus on elektromagnetilise vastastikuse mõjustuse erijuht, siis on täiesti loomulik konstandi α esinemine siin käsitletavas teoorias. Seda konstanti võib sisse tuua ka elektroni energia ja orbiidi raadiuse avaldises (vt. ülesanded 1 ja 2).

Kasutades konsonanti α , võime avaldise (34) esitada kujul

$$v = \frac{Z\alpha c}{n} . \quad (36)$$

Sellest valemist ilmneb, et elektroni kiirus on seda suurem, mida väiksem on kvantarv n , ehk arvestades tulemust (31), mida lähemal tuumale liigub elektron. Antud vesinikusarnases aatomis on elektroni kiirus suurim põhiseisundis liikumisel ($n = 1$), see kiirus on valemi (36) järgi $Z\alpha c$. Vesinikuaatomis ($Z = 1$) on see αc , s.o. vesinikuaatomi põhiseisundis on elektroni kiirus suurusjärgselt üks protsent valguse kiirusest vaakumis. Ergastatud seisundites on elektroni kiirus veelgi väiksem. Kuid tulemus $Z\alpha c$ võimaldab veel teistsugust interpretatsiooni. Elektroni suurim kiirus peab olema alati väiksem kui c . Seega $Z\alpha c < c$, millest $Z < \frac{1}{\alpha}$, s.o. $Z < 137$. Siit järeldame, et ei saa eksisteerida elemente, mille järjenumber on 136-st suurem. Seega juba Bohri teooria raamides selgub, et D.I. Mendelejevi keemiliste elementide perioodilisuse süsteem on tõkestatud.

B. Spektrid.

Footoni kiirgamisel peab elektroni energia algseisundis $w^{(i)}$ olema suurem tema energiast lõppseisundis $w^{(f)}$. Tähistame neid seisundeid kirjeldavad kvantarvud vastavalt n_i ja n_f . Tingimuse $w^{(i)} > w^{(f)}$ järgi peab valemi (33) alusel $n_i > n_f$. Edasi valemi (30) arvestamine annab: footoni kiirgumisega seotud ülemineku juhul peab algorbiidi raadius olema suurem kui lõpporbiidi raadius.

Kiirgunud footoni sageduse ν leiame Bohri sageduste reegli (10) abil. Arvestades veel valemist (33), saame:

$$\nu = \frac{Z^2 m e^4}{8 \epsilon_0^2 h^3} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right). \quad (37)$$

Niisiis: kui elektron siirdub kvantarvuga n_i kirjeldatud statsionaarsest seisundist kvantarvuga n_f kirjeldatud statsionaarsesse seisundisse ja $n_i > n_f$, siis kiirguva footoni sageduse võib Bohri järgi arvutada valemist (37).

Läheme valemi (4) abil üle lainearvule:

$$\bar{\nu} = \frac{Z^2 m e^4}{8 \epsilon_0^2 h^3 c} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right). \quad (38)$$

Nüüd võrdleme saadud tulemust (38) Balmeri seeria valemiga (5). Kooskõla tekib siis, kui $n_f = 2$ ja $n_i > 2$ ning

$$R = \frac{m e^4}{8 \epsilon_0^2 h^3 c}, \quad (39)$$

sest vesiniku juhul $Z = 1$. Kui asetada avaldisse (39) universaalkonstantide arvvaartused, saame kooskõla punktis 1 toodud Rydbergi konstandi väärtusega. Seega Bohri teooria selgitas, et vesiniku aatomispektri Balmeri seeria jooned tekivad siis, kui vesinikuaatomites elektronid siirduvad järjenumbriga $n_i > 2$ orbiidilt orbiidile, mille järjenumbr on 2.

Bohri teooria selgitas teistegi enne 1913. a. avastatud vesiniku aatomispektrite seeriade tekke ja ennustas ka uusi seeriaid. Seoses sellega on otstarbekas rõhutada, et füüsikateooria tähtsus ei piirdu ainult juba avastatud eksperimentaalsete faktide selgitamisega. Veelgi hinnatavam on teooria, mis ennustab seni tundmata fakte, mis seejärel leivad eksperimentaalse kinnituse.

Nagu vihjab analüüsitud Balmeri seeria näide ja valem (6), tuleb seeriat iseloomustavaks parameetriks lugeda kvantarvu n_f . Seerias tekivad aga erinevad jooned tänu kvantarvu n_i erinevatele väärtustele, misjuures $n_i > n_f$. Koondandmed vesiniku aatomispektrite seeriade kohta esitame alljärgneva tabeli kujul:

n_f	Seeria nimetus	n_i
1	Lymani seeria	2, 3, 4,
2	Balmeri seeria	3, 4, 5,
3	Pascheni seeria	4, 5, 6, ,,,...
4	Bracketti seeria	5, 6, 7,
5	Pfundi seeria	6, 7, 8,
6	Humphrey seeria	7, 8, 9,

Energiatasemete skeemi abil on nende seeriade teke näidatud joonisel 3, kus on näidatud ka mõnede spektrijoonte lainepikkused. Märgime, et paremini läbiuuritud Balmeri ja Lymani seeria jooned on saanud erinimetused. Näiteks Balmeri seerias nimetatakse H_α - jooneks spektrijoont, mis tekib, kui vesinikuaatomites elektronid siirduvad 3. statsionaarselt orbiidilt 2. statsionaarsele orbiidile.

Kirjutusviisi kompaktsuse huvides on otstarbekas lainearvu üldavaldis (38) vesinikusarnaste aatomite juhul ümber kirjutada Rydbergi konstandi kaudu valemi (39) alusel:

$$\bar{\nu} = Z^2 R \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right). \quad (40)$$

Valemist (40) järgneb, et kvantarvu n_i suurenemisel spektrijoone lainearv suureneb. Suurim lainearv $\bar{\nu}_\infty$ realiseerub piirjuhul $n_i \rightarrow \infty$:

$$\bar{\nu}_\infty = \frac{Z^2 R}{n_f^2}. \quad (41)$$

Kvantarvu n_i suurenemisel lähenevad spektrijoonte lainearvud üha enam piirlainearvule $\bar{\nu}_\infty$.

Teiselt poolt aga n_f suurenemisel nihkub $\bar{\nu}_\infty$ üha enam väiksemate lainearvude poole. Vastavalt sellele nihkuvad n_f suurenedes ka seeria teised jooned väiksemate lainearvude poole. Nii näiteks on Lymani seeria ultraviolettpiirkonnas, kuna Humphrey seeria on infrapunases piirkonnas. Põhimõtteliselt on võimalikud ka seeriad, millel $n_f > 6$. Kuid need

seeriad satuvad kaugesse infrapunasesse ja raadiosageduslikku piirkonda, milles mõõtmistehnika on seni vähem arenenud kui ultraviolet- ja nähtavas piirkonnas.

Rydbergi konstandi kaudu võib ka elektroni energia avaldise lühemalt üles kirjutada. Valemid (33) ja (39) annavad:

$$W_n = - \frac{Z^2 R_{hc}}{n^2} . \quad (42)$$

Märgime, et Bohri teooria võimaldab arvutada ka vesinikusarnase aatomi ionisatsioonienergia. Ionisatsioonienergia on energia, mis tuleb kulutada, et eemaldada elektron aatomist põhiseisundist lähtudes. Elektroni eemaldamisel aatomist muutub tema kaugus tuumast lõpmata suureks. Valemi (31) järgi on siis $n \rightarrow \infty$. Elektroni energia põhiseisundis on meie sümboolika järgi W_1 , seisundis, milles $n \rightarrow \infty$, on energia W_∞ . Seega ionisatsioonienergia

$$E_{ion} = W_\infty - W_1 . \quad (43)$$

Kasutades nüüd valemit (42), saame

$$E_{ion} = Z^2 R_{hc} . \quad (44)$$

Asendades valemisse (44) $Z = 1$ ja konstantide arvvaärtused, saame vesiniku aatomi ionisatsioonienergia $R_{hc} = 13,60$ eV, mis on kooskõlas eksperimendiga.

Valemi (44) abil saame arvutada ka vesinikusarnase aatomi ionisatsioonienergia. Teatavasti ionisatsioonienergia U_{ion} korrutis elementaarlaenguga võrdub ionisatsioonienergiaga.

Seega

$$U_{ion} = \frac{Z^2 R_{hc}}{e} . \quad (45)$$

Näiteks vesinikuaatomil on selle valemi järgi $U_{ion} = 13,60$ V.

Illustratsioonina käsitleme veel nn. Pickeringi seeria. Seeria sai nimetuse selle 1897. a. avastanud astronoomi nime järgi, kes uurides ühe tähe (ϵ - Puppis) spektrit, leidis, et selle spekter meenutab vesiniku aatomispektrit. Pickeringi seeria lainearvud alluvad valemile

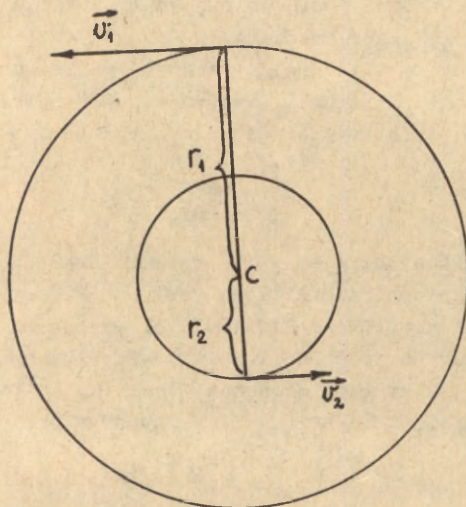
$$\bar{\nu} = R \left[\frac{1}{2^2} - \frac{1}{\left(\frac{k}{2}\right)^2} \right] , \quad (46)$$

kus R on Rydbergi konstant ja $k = 5, 6, 7, \dots$. Kui k on paarisarv, siis tekib kokkulangemine Balmeri seeria joontega.

Püüti tekitada Pickeringi seeriat laboratooriumi tingimustes atomaarses vesinikus. Kuid sellistel katsetel ei olnud edu. Lahenduse andis Bohr, kes oletas, et Pickeringi seeria kuulub hoopis ühekordselt ioniseeritud heeliumile ($Z = 2$), kui $n_f = 4$ ja $n_i > 4$. Sellisel juhul saamegi valemist (40) valemi (46). Selle eksperimentaalne kontroll heeliumi kasutamiseks andis positiivse tulemuse. Nii näidati, et Pickeringi seeria ei kuulu vesinikule. Kuid siiski täheldati, et Pickeringi seeria jooned ei lange üle ühe (s.o. siis, kui k on paarisarv), päris täpselt Balmeri seeria joontega kokku, olles viimaste suhtes veidi nihutatud lühemate lainepikkuste poole. Selle erinevuse selgitamiseks oli vaja Bohri teooriat täpsustada.

4. Tuuma liikumise arvestamine Bohri teoorias.

Eelmises punktis oletasime, et elektron liigub ümber paigaloleva tuuma. Tegelikult tiirlevad elektron ja tuum nurkkiirusega ω ümber ühise masskeskme C (vt. joon.4).



Joonis 4.

Tähistades elektroni ja tuuma kaugused masskeskmest vastavalt r_1 ja r_2 , ning nende massid vastavalt m ja M , järgneb masskeskme definitsioonist

$$\frac{r_1}{r_2} = \frac{M}{m} . \quad (47)$$

Elektroni ja tuuma vaheline kaugus r avaldub (vt. joon. 4)

$$r = r_1 + r_2 \quad (48)$$

Valemipaarist (47) ja (48) võime arvutada

$$\left. \begin{aligned} r_1 &= \frac{Mr}{m+M} \\ r_2 &= \frac{mr}{m+M} \end{aligned} \right\} (49)$$

Nüüd arvestame Newtoni II seadust. Elektroni tsentripetaalkiirendus on $r_1 \omega^2$, selle korrutis elektroni massiga võrdub kulonilise jõuga. Niisiis

$$mr_1 \omega^2 = \frac{Ze^2}{4 \pi \epsilon_0 r^2} . \quad (50)$$

Tuuma juhul saame samal viisil:

$$Mr_2 \omega^2 = \frac{Ze^2}{4 \pi \epsilon_0 r^2} . \quad (51)$$

Võttes r_1 esimesest või r_2 teisest valemist (49), saame valemist (50) või (51) ühesuguse tulemuse:

$$\frac{mMr\omega^2}{M+m} = \frac{Ze^2}{4 \pi \epsilon_0 r^2} . \quad (52)$$

Toome sisse elektroni ja tuuma suhtelise kiiruse $\vec{v} = \vec{v}_1 - \vec{v}_2$ (vt. joon. 4). Kuna \vec{v}_1 ja \vec{v}_2 on vastupidi suunatud vektorid, siis

$$v = |\vec{v}| = |\vec{v}_1| + |\vec{v}_2| . \quad (53)$$

Ilmselt

$$\left. \begin{aligned} |\vec{v}_1| &= r_1 \omega \\ |\vec{v}_2| &= r_2 \omega \end{aligned} \right\} (54)$$

Seega valemite (53) ja (48) abil

$$v = \omega r . \quad (55)$$

Arvestades tulemust (55) ja tuues sisse kahest osakesest koosneva süsteemi taandatud massi

$$\mu = \frac{mM}{m + M} , \quad (56)$$

saame valemile (52) anda kuju

$$\mu v^2 = \frac{Ze^2}{4 \pi \epsilon_0 r} . \quad (57)$$

Võrdleme avaldisi (17) ja (57). Mõlemad tulemused väljendavad Newtoni II seadust; esimene ühe osakese liikumise probleemis, teine kahe osakese liikumise probleemis, siit järeldame, et kahe osakese probleemi võime taandada ühe osakese probleemiks, kui ühe osakese probleemi valemite asendame osakese massi süsteemi taandatud massiga ja osakese kiiruse osakeste suhtelise kiirusega. Näiteks kvantiseerimistingimus (vt. (27)) saab nüüd kuju

$$\mu v r = n \hbar . \quad (58)$$

Kuna eelmises punktis arendatud teooria põhines valemitel (17) ja (27) ja nende analoogid on nüüd vastavalt valemid (57) ja (58), siis on ilmne, et võime ära kasutada kõiki eelneva punkti tulemusi, võttes arvesse ülalpool kirjeldatud asendusi. Et eelmise punkti põhitulemused avaldusid Rydbergi konstandi kaudu, siis piisab asendusest $m \rightarrow \mu$ avaldises (39). Seega tuuma liikumise arvestamisel avaldub Rydbergi konstant nii:

$$R = \frac{\mu e^4}{8 \epsilon_0^2 h^3 c} . \quad (59)$$

Võttes μ valemist (56), leiame

$$R = \frac{R_\infty}{1 + \frac{m}{M}} , \quad (60)$$

kus

$$R_{\infty} = \frac{me^4}{8 \epsilon_0^2 h^3 c} \quad (61)$$

Avaldisest (60) ilmneb, et Rydbergi konstant sõltub tuuma massist: on seda suurem, mida suurem on tuuma mass. Siiski on see sõltuvus võrdlemisi nõrk, sest $\frac{m}{M} \approx 10^{-4}$.

Konstandi R_{∞} füüsikaline sisu ilmneb valemist (60): $R = R_{\infty}$, kui $M \rightarrow \infty$. Seega R_{∞} võrdub Rydbergi konstandiga juhul, kui tuuma mass on lõpmatu suur.

Nüüd on arusaadavad ka eelmise punkti lõpul mainitud Pickeringi seeria omadused. Valemis (46) tuleb R all mõelda Rydbergi konstanti heeliumi juhul, kuid valemis (5) on R Rydbergi konstant vesiniku juhul. Kuna valemi (60) järgi on esimene konstant teisest suurem, ongi ilmne, et Pickeringi seeria jooned on Balmeri seeria vastavate joonte suhtes nihutatud suuremate lainearvude, s.o. väiksemate lainepikkuste poole.

Bohri teooriat võib arendada ka tuumajõudude juhul. Lihtsam on see deutroni juhul, kuna see koosneb ainult kahest osakesest: prootonist ja neutronist. Et prootoni ja neutroni mass on ligikaudu võrdsed, siis tuleb kindlasti arvestadamõlema osakese liikumist. Lähtekohaks on valemid (57) ja (58), kuid esimeses tuleb paremal poolel võtta tuumajõud, mis on korrutatud prootoni ja neutroni vahelise kaugusega. Lugejale, kes selle probleemi vastu huvi tunneb, soovitame artiklit /2/.

5. Kokkuvõtte.

Me veendusime selles, et Bohri teooria andis eksperimendiga kooskõlalise tulemuse vesinikusarnaste aatomite juhul. Kuid kvantiseerimistingimuste (11) rakendamine keerulisemate aatomite juhul, milles on rohkem kui üks elektron, ei andnud eksperimendiga kooskõlas olevaid tulemusi. Seega tuleb teha järeldus, et mingid olulised omadused on jäänud teoorias arvestamata. Nendeks osutusid osakeste laineomadused

(73/, lk. 187). Osakeste laineomaduste arvessevõtmisega asendati Bohri teooria kvantmehhaanikaga. Kvantmehhaanikas jäi kehtima Bohri sageduste reegel ja statsionaarse seisundi mõiste, kuid kvantiseerimistingimused kaotasid mõtte, kuna trajektoori mõiste ei ole osakestele enam kvantmehhaanikas rakendatav.

Kirjandus

1. D a n i n, D. M. Bohri avastus. - "Horisont", 1973, nr. 1, lk. 28.
2. L e m b r a, J. Bohri teooria tuumatungidega. - Koostanud: Osakeste ja valguse maailmast. Tartu, 1971, lk. 33.
3. P e i e r l s, R. Looduse seadused. Tln., 1962, lk.187.

Ülesanded.

1. Näidata, et elektroni energia vesinikusarnases aatomis võib esitada ka valemiga

$$W_n = - \frac{Z^2 \alpha^2 m c^2}{2n^2}$$

2. Konsonantide m , h ja c abil saab moodustada pikkuse dimensiooniga konstandi $\lambda = \frac{h}{mc}$, mida nimetatakse elektroni Comptoni lainepikkuseks. Näidata, et vesinikusarnases aatomis võib elektroni n -nda orbiidi raadiuse arvutada valemist

$$r = \frac{\lambda_n^2}{2\pi Z \alpha}$$

3. Arvutada vesinikuaatomis elektroni 2. ringorbiidi raadius ja elektroni kiirus sellel orbiidil.
4. Arvutada vesinikuaatomis elektroni tiirlemissagedus väikseima ergastusenergiaga ringorbiidil.
5. Arvutada He^+ juhul tuuma poolt tekitatud elektrivälja tugevus tuumale kõige lähemal ringorbiidil.
6. Arvutada elektroni kiirus kahekordselt ioniseeritud litiumiaatomi 3. ringorbiidil.
7. Leida Balmeri seerias lühima ja pikima lainepikkuse geomeetriline keskmine. Kas sellise lainepikkusega joon eksisteerib samas seerias?
8. Mitu korda suureneb elektroni ringorbiidi raadius vesinikuaatomis, kui seda ergastada footoniga, mille energia on 12,75 eV?
9. Ergastamise tulemusena viiakse vesinikuaatomid põhiseisundist seisundisse, milles kvantarv $n = 3$. Milliste lainepikkustega spektrijooned tekivad aatomite siirdumisel nimetatud ergastatud seisundist põhiseisundisse?

10. Arvutada He^+ spektris lainepikkus, mis vastab elektroni siirdele 3. ringorbiidilt 2. ringorbiidile.
11. Millise energiaga elektronidega tuleks vesinikuaatomeid pommitada, et tekiks üksainus Balmeri seeria joon?
12. Kui suure energiaga footon eemaldab vesinikuaatomi 2. ringorbiidilt elektroni, mis tuumast lõpmata kaugel olles omab kineetilist energiat 4 eV?
13. Arvutada energia, mida peab andma kahekordselt ioniseeritud liitiumiaatomile, et eemaldada elektron selle põhiseisundist.
14. Positroonium on elektronist ja positronist koosnev süsteem. Leida positrooniumi ionisatsioonenergia.
15. Kas $0,003 \text{ \AA}$ lahutusvõimega spektraalaparaadi abil saab eristada $^5\text{He}^+$ ja $^6\text{He}^+$ (vasak indeks märgistab massiarve) spektrijooni, mis tekivad elektroni siirdumisel väikseima energiaga ergastatud seisundist põhiseisundisse?

Märkused.

1. Sõnastuse lühiduse mõttes on ülesannete tekstides termini "ringorbiit" ees jäetud ära omadussõna "statsionaarne".

2. Ülesannete 1 ja 2 tekstis on kasutatud tähistusi, mis eespool toodi sisse teoreetiliste küsimuste käsitlemisel.

3. Ülesannete 3 - 15 vastused esitada arvvärtuste kujul. Energia väljendada seejuures elektronvoltides, ülejäänud suurused SI ühikutes.

* * *

Kontrolltööks nr. ... lahendada ülesanded
 Esitamise tähtaeg

S i s u k o r d

Eessõna	2
1. Lihtsamaid seaduspärasusi aatomispektrites	3
2. Bohri teooria põhiseisukohad	5
3. Vesinikuaatomi teooria Bohri järgi	9
A. Kvantiseerimistingimus ringorbiidi juhul ...	11
B. Spektrid	16
4. Tuuma liikumise arvestamine Bohri teoorias	20
5. Kokkuvõte	23
Kirjandus	24
Ülesanded	25

Яан Дембра. ТЕОРИЯ БОРА. На эстонском языке.
Тартуский государственный университет. ЭССР, г.Тарту,
ул. Миликооли, 18. Vastutav toimetaja A.Koppel.
Korrektor L. Jago. Paljundamisele antud 28. 11. 77.
Rotatoripaber 30x42 1/4. Trükipoognaid 1,75. Ting-
trükipoognaid 1,63. Arvestuspoognaid 1,23. Trükiarv
500. TRÜ trükikoda, ENSV, Tartu, Pälsoni t.14.Tell.
nr. 1490. Hind 5 kop.

5 kop.